Theoretische Physik III für das Lehramt L3, WS2003/04, Prof. H.J. Lüdde

Lösungen - Kapitel II Quantenmechanik

1

a) Die quantenmechanische Dichte $\rho = \psi^*\psi$ ist im Ortsraum ein Maß für die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen am Ort x zu finden.

$$\rho(x) = \psi^*(x,0)\psi(x,0) = \mid A \mid^2 \cdot e^{-\frac{x^2}{\Delta x^2}}$$

In unserem Falle (vergleiche Eigenschaften der Gauss-Verteilung) befindet sich das Teilchen mit hoher Wahrscheinlichkeit im Bereich $\mid x \mid \leq \Delta x$.
Die Stromdichte $\vec{j} = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\psi - \psi\frac{\partial}{\partial x}\psi^*\right)$ ist ein Maß für den *Wahrscheinlichkeitsfluss* und ist mit der Dichte über die Kontinuitätsgleichung verknüpft

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathrm{div}\,\vec{j} = 0\ ,$$

wenn man Teilchenzahlerhaltung annimmt (im relativistischen Fall nicht notwendig der Fall).

$$\begin{aligned}
\vec{j} &= \frac{\hbar}{2im}\left\{\mid A \mid^2 e^{-\frac{x^2}{2\Delta x^2}} \cdot e^{-ik_0x}\partial_x e^{-\frac{x^2}{2\Delta x^2}+ik_0x} - \mid A \mid^2 e^{-\frac{x^2}{2\Delta x^2}} e^{ik_0x}\partial_x e^{-\frac{x^2}{2\Delta x^2}-ik_0x}\right\} \\
&= \frac{\hbar}{2im} \mid A \mid^2 e^{-\frac{x^2}{\Delta x^2}} 2ik_0 \\
&= \rho\frac{\hbar k_0}{m}
\end{aligned}$$

Die klassische Stromdichte ist definiert als $\vec{j} = \rho \cdot \vec{v}$, so dass man $\frac{\hbar k_0}{m}$ als die Geschwindigkeit des Wellenpaketes auffassen kann (*Gruppengeschwindigkeit*).

b) Soll $\psi(x,0)$ ein einziges Teilchen beschreiben, muss die Wahrscheinlichkeit, irgendein Teilchen irgendwo im Raum zu finden, 1 sein, d.h.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho dx = 1\ .$$

Einsetzen und Verwendung des Fehlerintegrals liefert mit der Substitution $\frac{x}{\Delta x} = z \rightarrow dz = \frac{1}{\Delta x}dx$:

$$\mid A \mid^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{\Delta x^2}} dx = \mid A \mid^2 \Delta x \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} dz = \mid A \mid^2 \Delta x\sqrt{\pi} = 1$$

$$\rightarrow \mid A \mid^2 = \frac{1}{\Delta x\sqrt{\pi}}$$

c) Die Impulsverteilung erhält man durch *Fourier-Transformation* von $\psi(x,0)$

$$
\begin{aligned}
c(k) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dx\psi(x,0)e^{-ikx} \\
&= \frac{A}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2\Delta x^2}-i(k-k_0)x}
\end{aligned}
$$

Lösung des Integrals durch quadratische Ergänzung des Exponenten und Anwendung des Fehlerintegrals:

$$
\begin{aligned}
c(k) &= \frac{A}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\left(\frac{x^2}{2\Delta x^2}+i(k-k_0)x-\frac{\Delta x^2(k-k_0)^2}{2}\right)} \cdot e^{-\frac{\Delta x^2(k-k_0)^2}{2}} \\
&= \frac{A}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\left(\frac{x}{\sqrt{\pi}\Delta x}+i\frac{\Delta x(k-k_0)}{\sqrt{2}}\right)^2} \cdot e^{-\frac{\Delta x^2(k-k_0)^2}{2}}
\end{aligned}
$$

Substitution:

$$
z = \frac{x}{\sqrt{2}\Delta x} + i\frac{\Delta x(k-k_0)}{\sqrt{2}} \quad \rightarrow \quad dz = \frac{1}{\sqrt{2}\Delta x}dx
$$

$$
\Rightarrow \ c(k) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}}\Delta x e^{-\frac{\Delta x^2(k-k_0)^2}{2}}
$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass das Wellenpaket den Impuls k besitzt, ist dann

$$
\rho_k = \mid c(k) \mid^2 = \frac{\mid A \mid^2}{2\pi}\Delta x^2 e^{-\Delta x^2(k-k_0)^2} \ .
$$

Die Impulsverteilung des Wellenpaketes ist also ebenfalls eine Gauss-Verteilung, allerdings mit der Breite $\Delta k = \frac{1}{\Delta x}$ bzw. $\Delta p = \hbar\Delta k = \frac{\hbar}{\Delta x}$. Multipliziert man Orts- und Impulsunschärfe, erhält man für dieses Beispiel

$$
\Delta x \Delta p = \Delta x \frac{\hbar}{\Delta x} = \hbar \ ,
$$

also die exakte Erfüllung der Unschärferelation. Anschaulich sieht man: Je enger die Ortsraumverteilung ist ($\Delta x \rightarrow 0$), desto unschärfer wird die Impulsverteilung ($\Delta p \rightarrow \infty$).

d) Die Wellenfunktion zu irgendeinem Zeitpunkt erhält man aus

$$
\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k) e^{i\left(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} dk \ .
$$

Einsetzen der Impulsverteilung $c(k)$ liefert

$$
\psi(x,t) = \frac{A\Delta x}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\Delta x^2(k-k_0)^2}{2}+ikx-ik^2\frac{\hbar t}{2m}} dk \ .
$$

Der Exponent ist auch hier eine quadratische Form in k, so dass das Integral auf das Fehlerintegral zurückführbar ist. Quadratische Ergänzung des Exponenten:

$$\begin{aligned}
\text{Exponent} &= -\frac{\Delta x^2}{2}k^2 + \Delta x^2 k k_0 - \frac{\Delta x^2}{2}k_0^2 + ikx - ik^2\frac{\hbar t}{2m} \\
&= -\frac{\Delta x^2}{2}k_0^2 - \left[\underbrace{\left(\frac{\Delta x^2}{2} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)k^2}_{a^2} - \underbrace{(\Delta x^2 k_0 + ix)k}_{2ab}\right] \\
\to a &= \left(\frac{\Delta x^2}{2} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)^{1/2} k \\
\to b &= \frac{\Delta x^2 k_0 + ix}{2\left(\frac{\Delta x^2}{2} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)^{1/2}} \\
\text{Exponent} &= -\frac{\Delta x^2}{2}k_0^2 + \frac{(\Delta x^2 k_0 + ix)^2}{4\left(\frac{\Delta x^2}{2} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)} - \left[\left(\frac{\Delta x^2}{2} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)^{1/2} k - \frac{\Delta x^2 k_0 + ix}{2\left(\frac{\Delta x^2}{2} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)^{1/2}}\right]^2
\end{aligned}$$

Substituiere

$$z = \left(\frac{\Delta x^2}{2} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)^{1/2} k - \frac{\Delta x^2 k_0 + ix}{2\left(\frac{\Delta x^2}{2} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)^{1/2}} \;\to\; dz = \left(\frac{\Delta x^2}{2} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)^{1/2} dk$$

daraus folgt

$$\begin{aligned}
\psi(x,t) &= \frac{A\Delta x}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{\pi}\frac{1}{\left(\frac{\Delta x^2}{2} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)^{1/2}} e^{-\frac{\Delta x^2}{2}k_0^2 + \frac{(\Delta x^2 k_0 + ix)^2}{4\left(\frac{\Delta x^2}{2} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)}} \\
&= \frac{A}{\left(1 + i\frac{\hbar t}{m\Delta x^2}\right)^{1/2}} e^{-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}{\Delta x^2\left(1 + \left(\frac{\hbar t}{m\Delta x^2}\right)^2\right)}} .
\end{aligned}$$

Für die Dichte $\rho(x,t)$ erhält man

$$\rho(x,t) = \frac{|A|^2}{\left(1 + \left(\frac{\hbar t}{m\Delta x^2}\right)^2\right)^{1/2}} e^{-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}{\Delta x^2\left(1 + \left(\frac{\hbar t}{m\Delta x^2}\right)^2\right)}} .$$

$\rho(x,t)$ ist ebenfalls eine Gauss-Kurve mit dem Maximum an der Stelle $x_0 = \frac{\hbar k_0}{m}t = v_0 t$ (v_0 *Gruppengeschwindigkeit* siehe Aufgabenteil a)), d.h. das Maximum breitet sich mit der geschwindigkeit v_0 in x-Richtung aus. Die Breite der Gauss-Kurve ist offenbar zeitabhängig

$$\Gamma(t) = \Delta x \left(1 + \left(\frac{\hbar t}{m\Delta x^2}\right)^2\right)^{1/2} ,$$

d.h. das Wellenpaket fließt mit der Zeit auseinander, der Ort des Teilchens wird immer unschärfer. Wie kann man also einen Teilchenstrahl mit scharfem Impuls präparieren?

2

Es ist

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle &= \frac{d}{dt}\int\psi^* x\psi d\tau\\ &= \int\psi^* x\frac{\partial\psi}{\partial t}d\tau+\int\frac{\partial\psi^*}{\partial t}x\psi d\tau\ .\end{aligned}$$

Einsetzen der Schrödinger-Gleichung $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi$ bzw. der konjugiert komplexen Schrödinger-Gleichung $-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=H^*\psi^*=H\psi^*$ ergibt:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle &= -\frac{i}{\hbar}\int\psi^* x(H\psi)d\tau+\frac{i}{\hbar}\int(H\psi^*)x\psi d\tau\\ &= -\frac{i\hbar}{2m}\int\left[\psi^* x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}-\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}x\psi\right]d\tau\ .\end{aligned}$$

Partielle Integration ergibt

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle=-\frac{i\hbar}{m}\int\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}d\tau=\frac{1}{m}\langle\hat{p}_x\rangle$$

bzw. Verwendung der Kommutatorrelation

$$[x,\hat{H}]=i\hbar\frac{\partial\hat{H}}{\partial p_x}$$

führt auf

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle &= -\frac{i}{\hbar}\int\psi^*[x,\hat{H}]\psi d\tau=\int\psi^*\frac{\partial\hat{H}}{\partial p_x}\psi d\tau\\ &= \left\langle\frac{\partial\hat{H}}{\partial p_x}\right\rangle\ .\end{aligned}$$

Für den zweiten Ehrenfest'schen Satz gilt:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\hat{p}_x\rangle &= -i\hbar\frac{d}{dt}\int\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}d\tau\\ &= -i\hbar\left[\int\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial t}d\tau+\int\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\frac{\partial\psi}{\partial x}d\tau\right]\\ &= -\int\psi^*\frac{\partial}{\partial x}(\hat{H}\psi)d\tau+\int(\hat{H}\psi^*)\frac{\partial\psi}{\partial x}d\tau\\ &= -\int\psi^*\frac{\partial}{\partial x}(\hat{V}\psi)d\tau+\int\psi^*\hat{V}\frac{\partial\psi}{\partial x}d\tau\\ &= -\int\psi^*\frac{\partial\hat{V}}{\partial x}\psi d\tau=-\left\langle\frac{\partial\hat{V}}{\partial x}\right\rangle\end{aligned}$$

bzw. Verwendung der Kommutatorbeziehung

$$[p_x, \hat{H}] = -i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial x}$$

führt auf

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle \hat{p}_x \rangle &= -\frac{i}{\hbar}\int \psi^*[p_x, \hat{H}]d\tau = -\int \psi^* \frac{\partial \hat{H}}{\partial x}\psi d\tau \\ &= -\left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial x} \right\rangle . \end{aligned}$$

3

a) Zur Normierung muss das Integral

$$\iiint |\psi|^2 dV = \iiint \psi^*\psi dV = \iiint \psi^*\psi r^2 d\Omega dr = 1$$

berechnet werden. Da $\psi(\vec{r}) = \psi(r)$ bleibt vom Normierungsintegral

$$\iiint \psi^*\psi r^2 d\Omega dr = 4\pi \int_0^\infty \psi(r)^2 r^2 dr$$

übrig und mit

$$\psi = Ne^{-r/a} \;\rightarrow\; \psi^*\psi = N^2 e^{-2r/a}$$

ist

$$4\pi N^2 \int_0^\infty r^2 e^{-2r/a} dr = 1$$

auszuwerten. Mit der Substitution $x = \frac{2r}{a} \;\rightarrow\; dx = \frac{2}{a}dr \;\rightarrow\; dr = \frac{a}{2}dx$ bleibt

$$\pi N^2 \frac{a^3}{2} \int_0^\infty x^2 e^{-x} dx = 1 \; .$$

Dieses Integral kann mit Hilfe der *Gamma-Funktion*

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt \; ; \; \Gamma(n+1) = n!$$

gelöst werden (hier $x = 3$ bzw. $n = 2$):

$$\pi N^2 \frac{a^3}{2}\Gamma(3) = \pi N^2 \frac{a^3}{2} 2! = 1 \quad \rightarrow \quad N = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \; .$$

b) Die Lösung ist analog zu Aufgabenteil a):

$$\psi = Ne^{(-r/a)^2} \;\rightarrow\; \psi^*\psi = N^2 e^{-2(r/a)^2}$$

Es ist also

$$4\pi N^2 \int_0^\infty r^2 e^{-2(r/a)^2} dr = 1$$

auszuwerten. Mit Hilfe der Substitution $x = \frac{2r}{a} \;\rightarrow\; dx = \frac{2}{a}dr \;\rightarrow\; dr = \frac{a}{2}dx$ bleibt

$$4\pi N^2 a^3 \int_0^\infty x^2 e^{-2x^2} dx = 1 \; .$$

In einer Integraltabelle findet man

$$\int_0^\infty x^2 e^{-a^2x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{4a^3} \; .$$

Hier ist $a = \sqrt{2}$ zu verwenden und somit folgt

$$4\pi N^2 a^3 \frac{\sqrt{\pi}}{4(\sqrt{2})^3} = 1 \;\rightarrow\; N = \sqrt{\left(\frac{2}{\pi}\right)^{3/2} \frac{1}{a^3}} \; .$$

4

a) Zur Normierung der Wellenfunktion ist

$$\int_{-\infty}^\infty \psi(x)^* \psi(x) dx = N^2 \int_{-\infty}^\infty e^{-2x^2} dx = 1$$

zu berechnen. Da der Integrand eine gerade Funktion ist, gilt

$$N^2 \int_{-\infty}^\infty e^{-2x^2} dx = 2N^2 \int_0^\infty e^{-2x^2} dx \; .$$

In einer Integraltabelle findet man

$$\int_0^\infty e^{-a^2x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2a} \; .$$

Hier ist $a = \sqrt{2}$ zu verwenden, also

$$2N^2 \int_0^\infty e^{-2x^2} dx = 2N^2 \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2}} = 1 \;\rightarrow\; N = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4} \; .$$

b)

$$\begin{aligned}
< \hat{x} > &= \sqrt{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^\infty x e^{-2x^2} dx = \sqrt{\frac{1}{2}} \left[-\frac{1}{4} e^{-2x^2}\right]_{-\infty}^\infty = 0 \\
< \hat{p} > &= \sqrt{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^\infty e^{-x^2} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} e^{-x^2} dx = \sqrt{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^\infty e^{-x^2} \frac{\hbar}{i} (-2x) e^{-x^2} dx \\
&= -\sqrt{\frac{2}{\pi}} i\hbar 2 \int_{-\infty}^\infty x e^{-2x^2} dx = -\sqrt{\frac{2}{\pi}} i\hbar \left[-\frac{1}{4} e^{-2x^2}\right]_{-\infty}^\infty = 0 \; .
\end{aligned}$$

c) Zu zeigen: $[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar$

$$\begin{aligned} [\hat{p}, \hat{x}]\, \psi(x) &= (\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p})\psi(x) = \hat{p}(x\psi(x)) - x\left(-i\hbar \frac{d}{dx}\psi(x)\right) \\ &= -i\hbar\psi(x) - i\hbar x \frac{d}{dx}\psi(x) + i\hbar x \frac{d}{dx}\psi(x) = -i\hbar\psi(x) \end{aligned}$$

Zu zeigen: $[\hat{p}, \hat{x}^n] = -ni\hbar\hat{x}^{n-1}$ $(n > 1)$

Hierfür ist es nützlich, die Indentität $[A, B^n] = \sum_{k=0}^{n-1} B^k\, [A, B]\, B^{n-k-1}$ für zwei Operatoren A und B zu beweisen: Zunächst ist

$$\begin{aligned} [AB, C] &= ABC - CAB = ABC - CAB + ACB - ACB \\ &= A(BC - CB) + (AC - CA)B = A\,[B, C] + [A, C]\, B \end{aligned}$$

Wir beweisen die obige Identität durch vollständige Induktion:

- Verankerung: $n = 1$

$$\left[A, B^1\right] = B^0\, [A, B]\, B^0 = [A, B]$$

- $n \to n + 1$:

$$\begin{aligned} \left[A, B^{n+1}\right] &= [A, B^n B] = B^n\, [A, B] + [A, B^n]\, B \\ &= B^n\, [A, B] + \sum_{k=0}^{n-1} B^k\, [A, B]\, B^{n-k-1} B \\ &= B^n\, [A, B] + \sum_{k=0}^{n-1} B^k\, [A, B]\, B^{n-k} \\ &= B^n\, [A, B] + \sum_{k=0}^{(n+1)-1} B^k\, [A, B]\, B^{(n+1)-k-1} - \underbrace{B^n\, [A, B]}_{\text{Fall } n=k} \\ &= \sum_{k=0}^{(n+1)-1} B^k\, [A, B]\, B^{(n+1)-k-1}\ . \end{aligned}$$

Somit folgt:

$$\begin{aligned} [\hat{p}, \hat{x}^n] &= \sum_{k=0}^{n-1} \hat{x}^k\, [\hat{p}, \hat{x}]\, \hat{x}^{n-k-1} \\ &= \sum_{k=0}^{n-1} -i\hbar\hat{x}^k\hat{x}^{n-k-1} = -i\hbar \sum_{k=0}^{n-1} \hat{x}^{n-1} \\ &= -ni\hbar\hat{x}^{n-1}\ . \end{aligned}$$

<u>Zu zeigen:</u> $\left[\hat{p}, \hat{A}\right] = -i\hbar \frac{d\hat{A}}{dx}$

$$\begin{aligned}\left[\hat{p}, \hat{A}\right] \psi(x) &= (\hat{p}\hat{A} - \hat{A}\hat{p})\psi(x) = \hat{p}(\hat{A}\psi(x)) - \hat{A}(\hat{p}\psi(x) \\ &= -i\hbar \frac{d}{dx}\hat{A}\psi(x) + \hat{A}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\psi(x)\right) + \hat{A}i\hbar\frac{d}{dx}\psi(x) \\ &= \left(-i\hbar\frac{d\hat{A}}{dx}\right)\psi(x) \;.\end{aligned}$$

5

a) Die Schrödinger-Gleichung ist

$$i\hbar \frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r},t) + V(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t) \;. \tag{1}$$

$V(\vec{r},t)$ ist hier reell, das komplex Konjugierte von (1) ist

$$-i\hbar \frac{\partial\psi^*(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^*(\vec{r},t) + V(\vec{r},t)\psi^*(\vec{r},t) \;. \tag{2}$$

Nach Definition ist $\rho(\vec{r},t) = \psi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)$, daraus folgt

$$\frac{\partial\rho(\vec{r},t)}{\partial t} = \frac{\psi^*(\vec{r},t)}{\partial t}\psi(\vec{r},t) + \psi^*(\vec{r},t)\frac{\psi(\vec{r},t)}{\partial t} \;. \tag{3}$$

Wir setzen (1) und (2) in (3) ein:

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho(\vec{r},t)}{\partial t} &= \left[\frac{\hbar}{2im}\Delta\psi(\vec{r},t)^*\right]\psi(\vec{r},t) - \\ &- \frac{1}{i\hbar}V(\vec{r},t)\psi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t) - \\ &- \psi^*(\vec{r},t)\left[\frac{\hbar}{2im}\Delta\psi(\vec{r},t)\right] + \\ &+ \frac{1}{i\hbar}\psi^*(\vec{r},t)V(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t) \\ &= \frac{\hbar}{2im}\left[\psi^*(\vec{r},t)\Delta\psi(\vec{r},t) - \psi(\vec{r},t)\Delta\psi^*(\vec{r},t)\right] \;.\end{aligned} \tag{4}$$

Gleichung (4) können wir auch schreiben als

$$-\frac{1}{m}Re\left[\psi\left(\frac{\hbar}{i}\,\mathrm{grad}\,\psi\right)\right] = -\vec{j}(\vec{r},t) \;. \tag{5}$$

Jetzt benutzen wir

$$\mathrm{div}(U\vec{A}) = (\mathrm{grad}\,U)\cdot\vec{A} + U(\mathrm{div}\,\vec{A})$$

und erhalten aus (5)

$$\begin{aligned}
\operatorname{div}\vec{j}(\vec{r},t) &= \frac{\hbar}{2im}\Big[(\operatorname{grad}\psi^*)\cdot(\operatorname{grad}\psi)+\psi^*(\Delta\psi)- \\
&- (\operatorname{grad}\psi)\cdot(\operatorname{grad}\psi^*)-\psi(\Delta\psi^*)\Big] \\
&= \frac{\hbar}{2im}\left[\psi^*\Delta\psi-\psi\Delta\psi^*\right] \, .
\end{aligned}$$

Durch den Vergleich mit (4) erhält man schließlich die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial\rho(\vec{r},t)}{\partial t}+\operatorname{div}\vec{j}(\vec{r},t)=0 \, .$$

b) Wellenfunktion: $\psi(x,t)=\left[Ae^{i\frac{px}{\hbar}}+Be^{-i\frac{px}{\hbar}}\right]e^{-i\frac{p^2t}{2m\hbar}}$.
Stromdichte: $\vec{j}=\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\psi-\psi\frac{\partial}{\partial x}\psi^*\right)$.
Die „Zutaten“der Rechnung sind gegeben durch

$$\begin{aligned}
\psi^* &= \left[A^*e^{-i\frac{px}{\hbar}}+B^*e^{i\frac{px}{\hbar}}\right]e^{i\frac{p^2t}{2m\hbar}} \, , \\
\frac{\partial\psi}{\partial x} &= \left[A\frac{ip}{\hbar}e^{i\frac{px}{\hbar}}-B\frac{ip}{\hbar}e^{-i\frac{px}{\hbar}}\right]e^{-i\frac{p^2t}{2m\hbar}} \, , \\
\frac{\partial\psi^*}{\partial x} &= \left[-A^*\frac{ip}{\hbar}e^{-i\frac{px}{\hbar}}+B^*\frac{ip}{\hbar}e^{i\frac{px}{\hbar}}\right]e^{i\frac{p^2t}{2m\hbar}} \, .
\end{aligned}$$

Damit folgt für die Stromdichte nach kurzer Rechnung

$$\begin{aligned}
\vec{j} =& \frac{p}{2m}\Big[A^*A-A^*Be^{-i\frac{2px}{\hbar}}+B^*Ae^{i\frac{2px}{\hbar}}-B^*B \\
&+A^*A+A^*Be^{-i\frac{2px}{\hbar}}-B^*Ae^{i\frac{2px}{\hbar}}-B^*B\Big] \\
&= \frac{p}{m}\left[\mid A\mid^2-\mid B\mid^2\right] \, .
\end{aligned}$$

Zur Interpretation:

$\psi(x,t)$ ist die Superposition von zwei Teilchenströmen, die sich in entgegengesetzte Richtungen bewegen. Jeder der Teilchenströme ist konstant und zeitunabhängig in seiner Größe. Der Term $e^{-ip^2t/2m\hbar}$ zeigt, dass die Teilchen die Energie $\epsilon=p^2/2m$ haben. Die Amplituden der Teilchenströme sind A und B.

c) Nach Voraussetzung ist das Integral $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x,t)|^2dx$ endlich, d.h. $\lim_{x\to\pm\infty}|\psi(x,t)|^2=0$. Zu berechnen ist

$$\int_{-\infty}^{\infty}j(x)dx=\frac{\hbar}{2im}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}-\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right]dx \, .$$

Partielle Integration ergibt:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x,t)\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial x}dx &= \lim_{a\to\infty}\left([\psi(x,t)\psi^*(x,t)]_{-a}^{a}-\int_{a}^{a}\psi^*(x,t)\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\right)\\ &= 0-\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}dx\end{aligned}$$

Einsetzen führt schließlich auf

$$\int_{-\infty}^{\infty}j(x)dx=\frac{1}{m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)dx=\frac{\langle p\rangle}{m}\ .$$

6

Die Schrödinger-Gleichung lautet:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+iV\right)\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

und die konjugiert komplexe Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta-iV\right)\psi^*=-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\ .$$

Multipliziert man die erste Gleichung von links mit ψ^*, die zweite mit ψ und subtrahiert die Ergebnisse voneinander, so bleibt

$$i\hbar\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi^*\Delta\psi-\psi\Delta\psi^*)+2iV\psi^*\psi$$

bzw.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)-\frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\Delta\psi-\psi\Delta\psi^*)=\frac{2}{\hbar}V\psi^*\psi\ .$$

Da für die Stromdichte $\vec{j}=-\frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\,\mathrm{grad}\,\psi-\psi\,\mathrm{grad}\,\psi^*)$ gilt, erhält man

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)+\mathrm{div}\,\vec{j}=\frac{2}{\hbar}V\psi^*\psi\ .$$

Im Fall reeller Potentiale ist die rechte Seite der Gleichung null, d.h. die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho=\psi^*\psi$ erfüllt die Kontinuitätsgleichung. Wenn die rechte Seite positiv ist, wird Wahrscheinlichkeit erzeugt (Quellen), ist sie negativ, geht Wahrscheinlichkeit verloren (Senken), Teilchen werden absorbiert.

7

a)

$$\begin{aligned}\left[\hat{\vec{r}},\hat{\vec{p}}\right] &= -i\hbar\left[\hat{\vec{r}},\nabla_{\vec{r}}\right]\\ &= -i\hbar(\vec{r}\cdot\nabla_{\vec{r}}-(\nabla_{\vec{r}}\cdot\vec{r})-r\cdot\nabla_{\vec{r}})\\ &= 3i\hbar\end{aligned}$$

b)

$$\begin{aligned}
\left[\hat{l}_x, \hat{l}_y\right] &= \hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x \\
&= -\hbar^2 \left[\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) - \left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\right] \\
&= -\hbar^2\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right) \\
&= i\hbar\hat{l}_z
\end{aligned}$$

c) Hilfreiche Beziehung zur Lösung:

$$\left[\hat{l}_i, \hat{l}_j\right] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{l}_k \ .$$

Dabei ist ϵ_{ijk} der vollständig antisymmetrische Tensor in 3 Dimensionen auch *Levi-Civita-Symbol* genannt:

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 \text{ falls i,j,k eine gerade Permutation von 1,2,3 ist: (1,2,3),(2,3,1),(3,1,2)} \\ -1 \text{ falls i,j,k eine ungerade Permutation von 1,2,3 ist: (3,2,1),(2,1,3),(1,3,2)} \\ 0 \text{ falls zwei oder mehrere Indices gleich sind .} \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
\left[\hat{l}^2, \hat{l}_y\right] &= (\hat{l}^2\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}^2) \\
&= (\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2)\hat{l}_y - \hat{l}_y(\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2) \\
&= \hat{l}_x^2\hat{l}_y + \hat{l}_z^2\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x^2 - \hat{l}_y\hat{l}_z^2 \\
&= \hat{l}_x\hat{l}_x\hat{l}_y + \hat{l}_z\hat{l}_z\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x^2 - \hat{l}_y\hat{l}_z^2 \\
&= \hat{l}_x(i\hbar\hat{l}_z + \hat{l}_y\hat{l}_x) + \hat{l}_z(-i\hbar\hat{l}_x + \hat{l}_y\hat{l}_z) - \hat{l}_y\hat{l}_x^2 - \hat{l}_y\hat{l}_z^2 \\
&= 0
\end{aligned}$$

d)

$$\begin{aligned}
\left[\hat{l}_y, \frac{1}{r}\right] &= i\hbar\left[x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x}, \frac{1}{(x^2+y^2+z^2)^{1/2}}\right] \\
&= i\hbar\Bigg(- x\frac{z}{(x^2+y^2+z^2)^{3/2}} + \frac{x}{(x^2+y^2+z^2)^{1/2}}\frac{\partial}{\partial z} + \\
&+ z\frac{x}{(x^2+y^2+z^2)^{3/2}} - \frac{z}{(x^2+y^2+z^2)^{1/2}}\frac{\partial}{\partial x} - \\
&- \frac{x}{(x^2+y^2+z^2)^{1/2}}\frac{\partial}{\partial z} + \frac{z}{(x^2+y^2+z^2)^{1/2}}\frac{\partial}{\partial x}\Bigg) \\
&= 0
\end{aligned}$$